

10. 학사논문 지도교수: 여 재 익

10-1. [수치해석]복잡한 구조물에서의 연소/폭발 모델링 및 해석

10-2. [수치해석]가스터빈 연소 해석

10-3. [수치해석]고체 폭약 및 추진제 연소특성 모사

10-4. [실험]무통증 주사기 개발 및 연구

10-5. [실험]분광법(LIBS, Raman spectroscopy) 활용 연구

10-6. [실험]고체 고에너지물질의 노화 분석 및 수명 예측

실험실: 고에너지 응용 연구실 XEL(eXtreme Energy Lab.)

연구실 홈페이지: <http://ecl.snu.ac.kr/>

교수 연락처: (02) 880-9334, E-mail: jjyoh@snu.ac.kr

대표조교: 양준호 (02) 880-1507, E-mail: vkgkgk1002@snu.ac.kr

10-1. [수치해석]복잡한 구조물에서의 연소/폭발 모델링 및 해석

3차원 공간에서 수치 해석의 핵심은 계산하고자 하는 영역의 경계를 설정하는 것이다. 2차원 영역에서 물질의 경계면을 설정하는 방식은 수학적인 수식을 이용하였던 반면, 3차원 영역으로 넘어오게 되면 이러한 일반적인 수식만으로는 계산하고자 하는 영역을 설정하는 방식은 불가능하다. 따라서, Autocad 또는 Solidworks 등 3D-Computer Aided Design(CAD)를 이용하여, 원하는 형상을 보다 손 쉽게 모델링한 후, STL file format 형식으로 추출하여 3차원 형상의 경계를 설정하는 알고리즘이 개발되었다. 이를 통해 복잡한 구조물에서의 연소 및 폭발현상 수치해석이 가능하게 된다. 한편 연소현상에 대한 해석도 중요하지만 연소에 의한 압력이 구조체에 전달 되었을 경우, 구조체의 거동 및 파괴를 예측하기 위한 fluid structure interaction(FSI) 기법이 필요하게 된다. FSI 기법은 유체와 고체 사이의 경계면을 추적하고 경계에서 경계값(boundary condition)을 결정해 주어야 유체와 고체의 해석을 수행할 수 있다. 본 연구실에서는 ghost fluid method(GFM)을 사용하여 경계면 추적 및 경계값을 결정한다. 또한 3차원의 대용량 계산에서는 computational load를 최소화하기 위해 필요한 부분에 Mesh를 세분화 해주는 방법인 Adaptive Mesh Refinement (AMR)와 수치해석을 병렬적으로 나누어 계산하는 Message Passing Interface (MPI)를 사용한다.

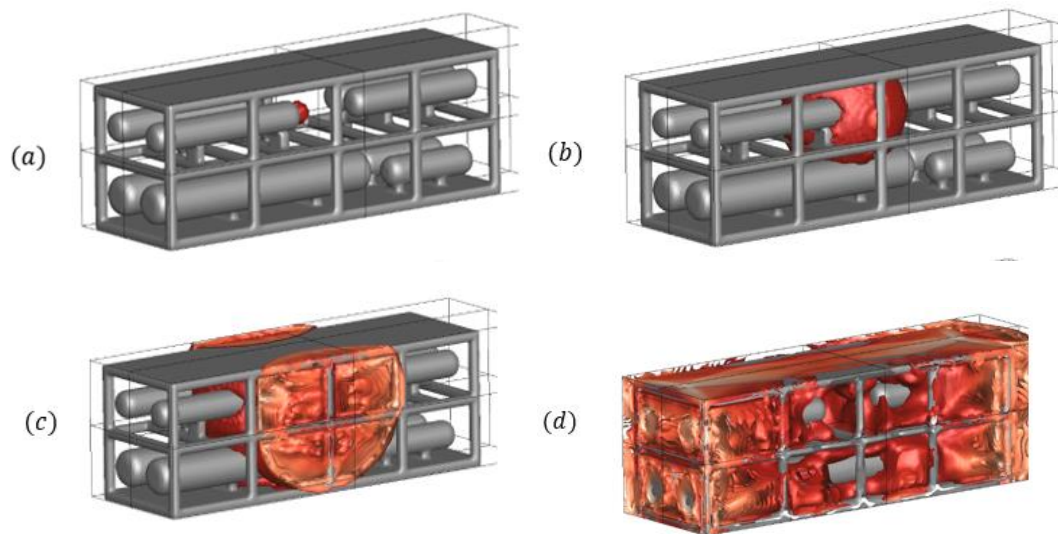


Fig 1. Deflagration spreading inside a plant module shown at different times.

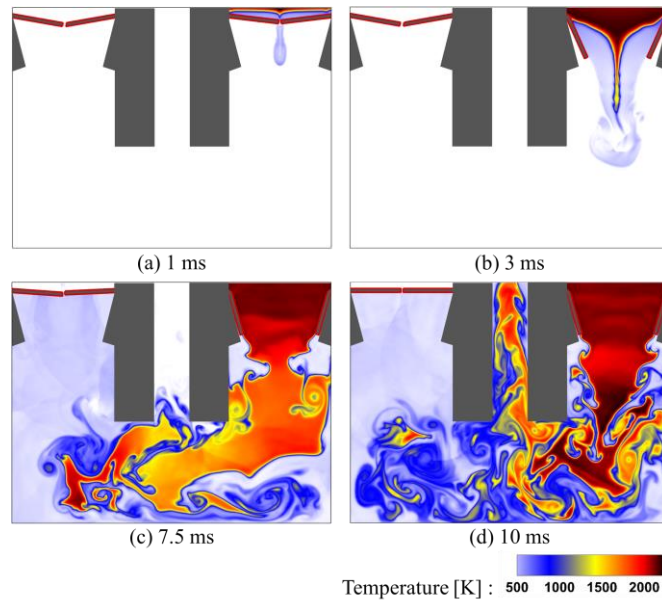


Fig 2. 로켓 발사대 하부 지지대 형상 변화 및 로켓 화염의 온도분포

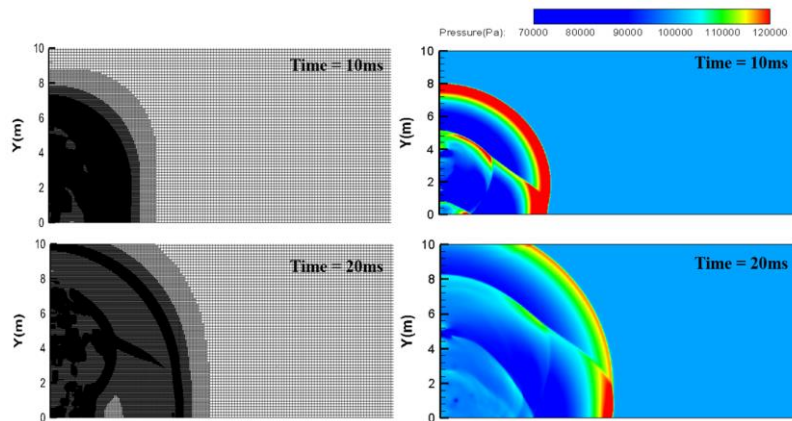


Fig 3. AMR process (Left) and 2D blast wave propagation pressure contour (Right) at 10, 20 ms.

학부생 선택 가능 논문 주제

10-1-1 3 차원의 다양한 형상에서 기체의 화염 모사 (Fig 1)

10-1-2 차세대 우주추진 체계 개발을 위한 FSI 해석 (Fig 2)

10-1-3 고속계산 방법을 이용한 고폭약의 폭풍과 위력 해석 (Fig 3)

담당조교 : 김현준 (kimhj87@snu.ac.kr)

10-2. [수치해석]가스터빈 연소 해석

연소불안정을 수치해석을 이용해 조사하고 예측하는 연구가 진행 중이다. 연소불안정은 연소실 내부의 화염과 유동으로 인해 압력이 섭동함으로서 발생하며 소음, 화염 형상, reactant flow rate에 영향을 미치므로 이를 실험적, 수치해석적으로 예측하는 작업은 연소기 설계에 있어 매우 중요한 문제라고 할 수 있다. 현재 Fluent, OpenFoam, OSCILOS 등의 유체 해석 프로그램들을 이용한 연소불안정 연구가 학계에서 진행 중이다.

본 연구에서는 압력 기반의 압축성 OpenFoam solver를 이용해 수치해석을 진행하고 있다. 우선적으로 cold flow와 연소 현상이 발생하는 hot flow의 비교 대조를 통해 화학반응이 연소불안정에 미치는 영향을 파악하며 이에 더해 swirl flow에서 발생하는 와류로 인한 연소불안정을 large eddy simulation (LES) 난류 모델을 적용해 파악하는 연구가 진행 중이다. 나아가 실험에서 진행되었던 모형 가스터빈에서 주입되는 혼합연료의 조성 변화와 연소실의 길이 변화로 인해 나타나는 연소불안정 경향성을 수치해석적으로 예측하고 고체와 유동을 함께 해석할 수 있는 house code간의 비교를 통해 연소불안정이 고체 형태의 연소기 구조체에 주는 영향을 파악하는 연구를 진행할 계획이다.

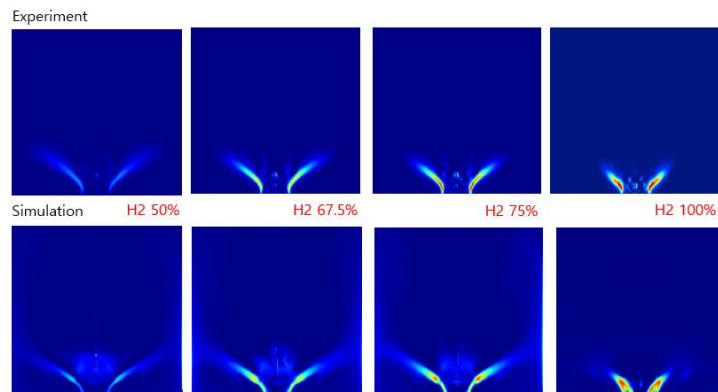


Fig 1. Comparison of flame shape in various fuel composition

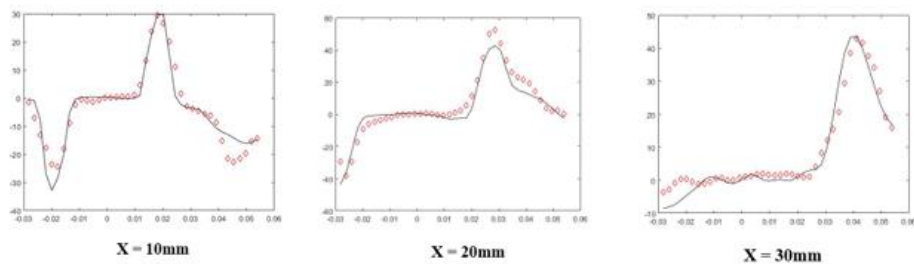


Fig 2. Radial profiles of the time-averaged radial velocity at various axial locations in H2 50% 75% fuel composition. Experiments (symbols) and LES simulation (lines)

학부생 선택 가능 논문 주제

10-2-1 OpenFOAM 을 이용한 연소 불안정 해석 (Fig 1, Fig 2)

담당조교 : 남재현 (wogus1336@snu.ac.kr)

10-3. [수치해석]고체 폭약 및 추진제 연소특성 모사

고체 혹은 액체 상의 추진제, 화약 등과 같은 고에너지 물질의 정확한 전산모사를 위해서는 기본적인 Navier-Stokes 지배 방정식에 더하여 정확한 형태의 화학반응 속도식이 구성방정식으로서 필요하다. 이에 대해 시차주사 열량계 (Differential Scanning Calorimetry, 이하 DSC)를 통하여 구성된 화학반응 속도식을 사용한다. 이는 계산 코드상에서 계산 되는 화학종 변수가 1개로 유지되기 때문에 1-step 화학반응식의 높은 계산 효율을 가진다. 그리고 그림 1과 같이 매 질량분율마다 변화하는 매우 구체적인 속도식 변수로 표현하기 때문에 높은 정확성을 동시에 획득할 수 있다. 이를 토대로 타겟 문제에 맞게 모델링하여 수치적으로 해석하는 연구를 하고자 한다.

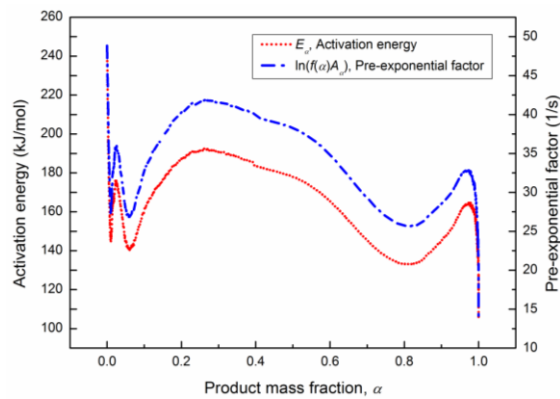


Fig 1. DSC 기반 반응속도식의 반응 속도 변수

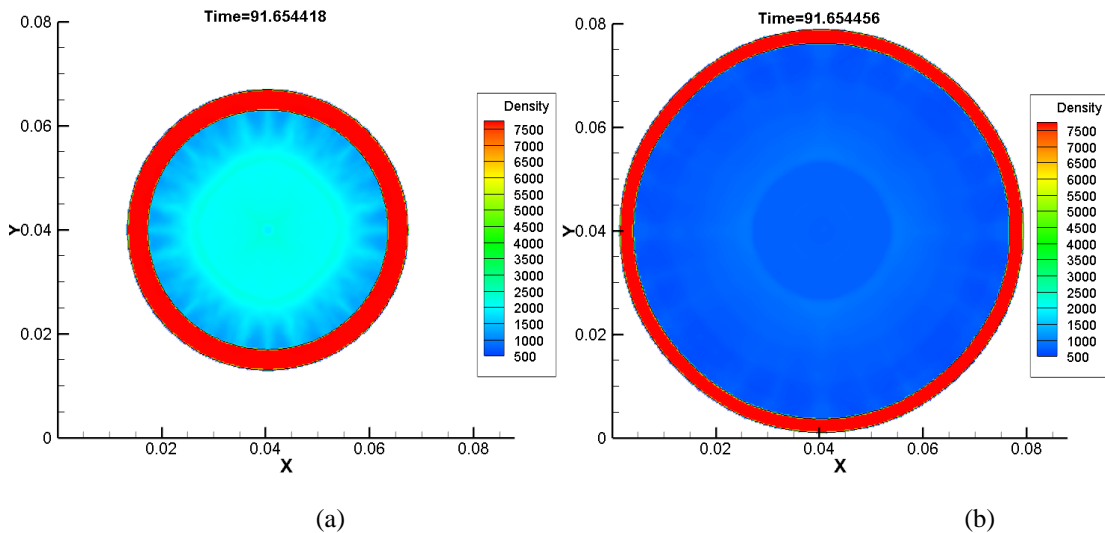


Fig. 2. Density contour of PBX #2 reacting violently

한편 RDX, HMX, PETN 등으로 대표되어지는 고폭약은 현대에 이르러서는 열압성능을 극대화 시키기 위해서 단일 조성으로 사용되기 보다는 다양한 고에너지물질을 섞어서 Heterogeneous 폭약을 구성하게 된다. 예를 들면 알루미늄과 같은 반응금속물질을 고폭약에 첨가하게 되면 후 연소(Afterburning) 특성으로 인해서 반응시간을 길게 가져갈 수 있어

더 강력한 위력을 지니게 된다(Fig 3). 이러한 여러 물질이 고려된 Heterogeneous explosive를 전에는 Continuum한 영역으로 반응을 모델링하였기 때문에 물질 개별의 특성이 반응모델에 반영되기 어렵다는 한계가 있었다. 본 연구에서는 Mesoscale영역에서 Heterogeneous 폭약의 반응을 수치해석한다. 이를 통해 함유된 물질의 개별 반응 및 물질 간의 상호작용을 살펴볼 수 있으며 궁극적으로는 여러 조성에 따른 폭약의 위력 및 고유한 특성을 정확히 분석 가능하게 된다.

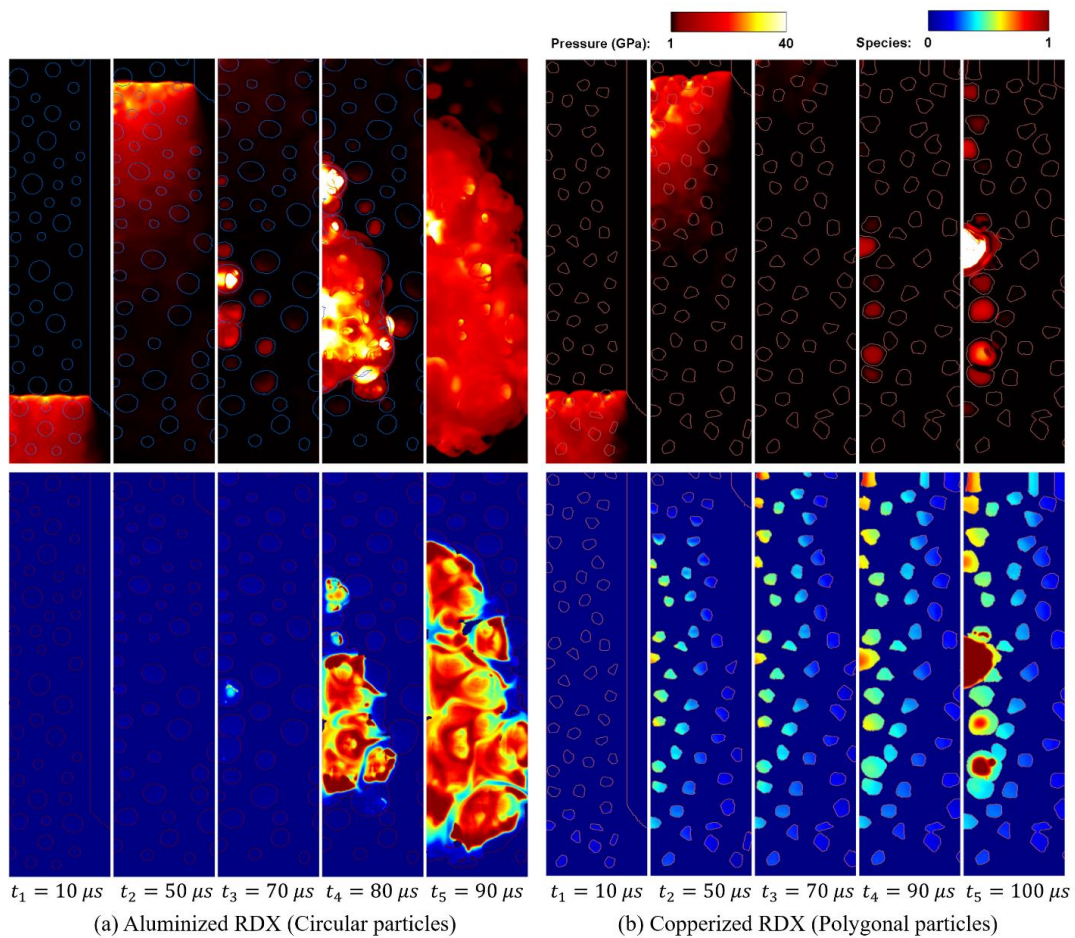


Fig 3. Timed images of the simulated pressure (upper) and reaction progress variable (lower) contours for (a) aluminized RDX, (b) copperized RDX. The shock propagation of the RDX component and the subsequent afterburning of the metal particles are shown.

학부생 선택 가능 논문 주제

10-3-1 DSC kinetics 를 활용한 고에너지 물질의 연소 해석 (Fig 1, Fig 2)

10-3-2 Heterogeneous 폭약의 메조스케일 영역 폭발 모델링 (Fig 3)

담당조교 : 최상훈 (sanghun1011@snu.ac.kr)

10-4. [실험]무통증 주사기 개발 및 연구

액체 내 전극 사이에 전압을 가하는 경우에 높은 전기장이 형성되면서 액체가 급격하게 발열 및 이온화 되어 플라즈마 채널을 생성하게 된다. 생성된 채널은 줄발열에 의해 팽창하게 되며 이온화된 기체를 포함한 버블과 압력파가 생성되어 액체 내부로 빠르게 전달된다. 본 연구에서는 이상의 과정을 거친 절연 파괴 현상을 통해 생성된 압력파를 전기적으로 제어하여 미소 약물분사 기술을 구현하고자 한다.

생성된 미소젯은 상처 없이 피부를 침투시키는데 매우 효율적이다. 미소젯의 속도, 미립화 정도, 젯의 형상, 방출량 등 침투와 관련된 변수들과 전기 스파크로 생성된 버블과의 상관관계 분석이 주요한 연구 주제 중에 하나이다. 결론적으로 각 환자에 맞는 최적의 시술을 위해서는 인슐린의 침투 깊이 및 침투량의 제어가 필요하며 이는 곧 미소젯의 특성을 조절 및 최적화 하는 것을 의미한다. 제안하는 인슐린 주입 장치는 비침습 비접촉의 분사식 주사기의 장점을 유지하는 동시에 기존에 분사식 주입 장치의 단점을 새로운 메커니즘을 도입하여 문제를 극복하는 동시에 새로운 차원의 인슐린 전달 장치를 제안하고자 한다.

미소젯을 이용하면 소량의 약물을 펄스 형태로 반복적인 주입이 가능하기 때문에 인슐린을 환자에 환자에 최소부위에 특정 깊이까지 침투하는 방식과 넓은 부위에 고르게 침투하는 것이 모두 가능하다. 왼쪽의 침투 결과는 잉크를 돼지 피부에 국소부위침투, 넓은부위침투 시키고 광학 현미경으로 촬영한 결과이다.

정부주도 U-tech 밸리 창업 지원 프로그램에 선정되어 현재 바이오에이지 라는 회사를 설립하여 무통증 인슐린 주사기 상용화 진행중.

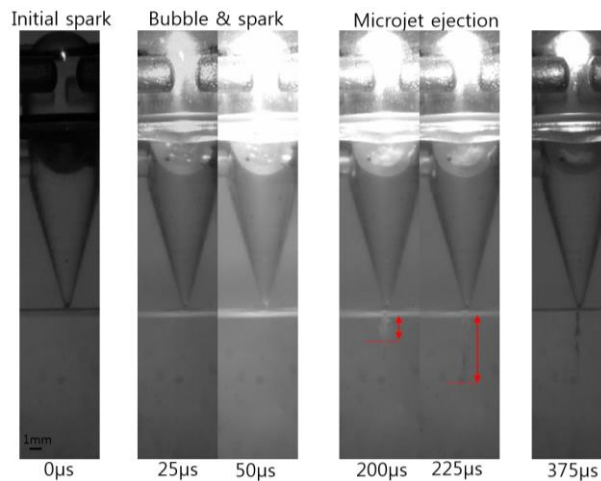


Fig 1. 스파크 생성 및 그에따른 마이크로젯 생성

학부생 선택 가능 논문 주제

10-4-1 전기 스파크를 이용한 약물전달 시스템 개발

담당조교 : 함휘찬 (hamn2012@snu.ac.kr)

10-5. [실험]분광법(LIBS, Raman spectroscopy) 활용 연구

본 연구실은 우주 탐사시에 분자 신호와 원자 신호를 동시에 검출하기 위하여 전세계 최초로 분자 구조를 볼 수 있는 Raman 분광법과 원자를 볼 수 있는 LIBS를 통합하였다. Double pulse 시스템을 사용하여 분자와 원자 신호를 동시에 도출하는 한편 laser induced plasma를 두 번 만들어 signal enhancement까지 이루어내었다. 본 연구 결과는 다양한 우주 탐사 탐제체에 보급되어 사용될 수 있을 것이다.

또한 우주에의 활용 외에도 포렌식 수사기법으로써 겹친 지문 분리에도 이러한 분광법을 사용할 수 있다. 겹친 지문을 분리하기 위해서는 기본적으로 지문의 출처에 따라 레이저 스펙트럼의 경향성이 어떻게 형성되어 있는지 검출하는 것이 중요하다. 우선적으로 레이저 스펙트럼의 경향성을 주성분 분석 데이터로 변환하고, 변환된 주성분 데이터는 비교하여 추후에 지문의 출처겹친 지문을 각각 분리하였다. 중간에는 classification 방식을 적용하여, 지문의 출처가 다른 경우에 레이저 스펙트럼을 기반으로 지문의 출처를 추측할 수 있도록 알고리즘을 구축하였다. LIBS 기반의 지문 분리 기술은 범죄현장에서 겹친 지문 증거물이 있는 상황에서 지문을 분리하여 범죄자의 신상까지 조사할 수 있다. 현재 사용되는 지문 감식 장치들은 하나의 지문을 선명하게 하는 작업과 이미지를 검출하여 매칭하는 것에 주력한다. 그러나 본 연구의 결과물은 겹친 지문의 이미지를 화학적 조성을 기반하여 분리 및 재구축할 수 있으며, 추후 이미지 처리를 통하여 지문의 출처를 밝히는 데에 일조할 수 있을 것으로 기대된다.

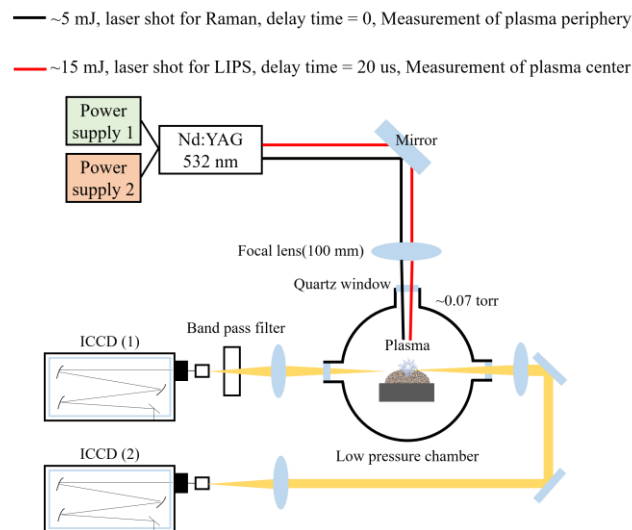


Fig 1. 실험 원리 및 장치셋업

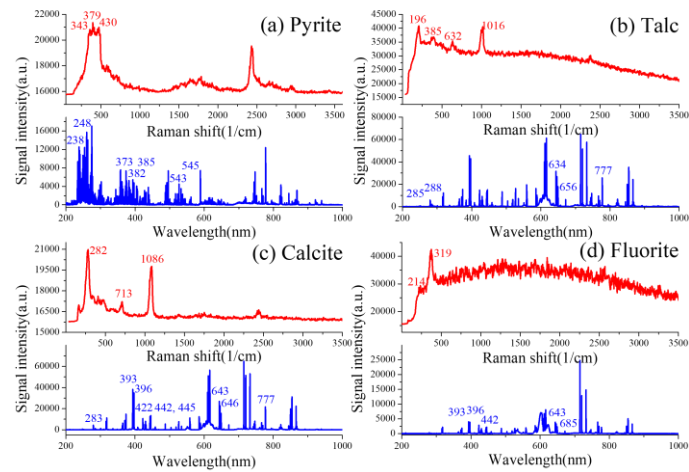


Fig 2. Double pulse Raman-LIBS 결과

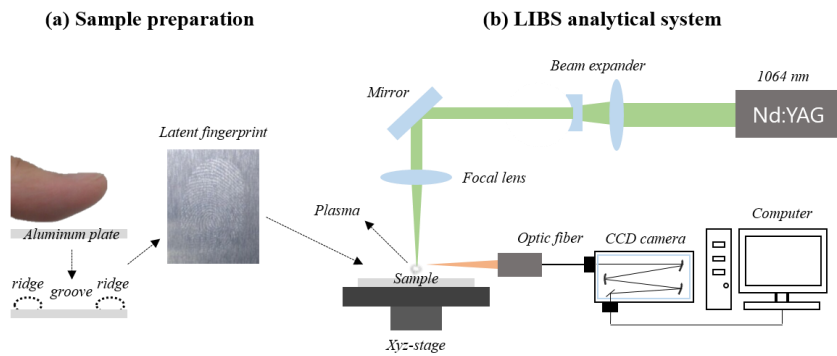


Fig 3. 실험 원리 및 장치셋업

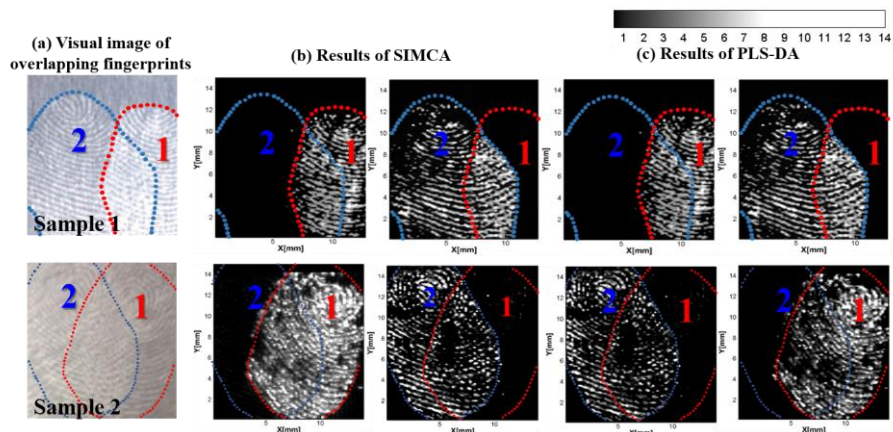


Fig 4. 겹친 지문 분리 결과

학부생 선택 가능 논문 주제

10-5-1 DSC kinetics 를 활용한 고에너지 물질의 연소 해석 (Fig 1, Fig 2)

10-5-2 Double pulse Raman-LIBS 시스템을 통한 우주탐사 연구

담당조교 : 양준호 (vkgkgk1002@snu.ac.kr)

10-6. [실험]고체 고에너지물질의 노화 분석 및 수명 예측

고에너지 물질은 고체 연료와 산화제로 이루어진 합성 물질로, 외부 에너지에 의해 화학 엔탈피와 열적 엔탈피가 급격하게 변화하는 물질이다. 따라서, 고 에너지 물질은 순간적으로 큰 힘이 필요한 시스템인 폭약, 추진제, 에어백 등 다양하고 실용적인 분야에 광범위하게 사용된다. 이런 고 에너지 물질의 활성화 에너지, 빈도 인자, 반응 개시 여부 등은 에너지 물질의 반응 방식과 신뢰성을 결정하는 중요한 요소이다. 고에너지물질이 장기간 저장될 시에 연료가 산화되는 등 조기화학반응의 결과로 발열량 감소나 활성화에너지의 증감 변화와 같은 성능 변이가 발생할 가능성이 높아지며 이는 시스템상에 치명적인 결과를 초래할 수 있다. 따라서 노화에 대한 예측 및 저장기간 등을 결정해 줘야하는 연구가 필수적이다.

본 연구실에서는 크게 2개의 방법으로 고에너지물질의 노화를 분석한다.

첫번째는 레이저활용 분광기인 LIBS를 이용하는 방법이다. 본 연구실에서는 군에서 사용되는 지연신관 내부 물질인 지르코늄(Zr)계 지연제를 LIBS를 통해 분석하였다. 지르코늄(Zirconium, Zr)은 높은 온도에서 강한 열을 방출하는 에너지원으로 Pyrotechnic industry에서 다양한 방면에서 사용된다. 그러나 시간경과에 따라 산화로 인한 노화(Aging)가 진행되면 ZrO_2 가 생성되며 폭발성능을 잃어버리게 된다. 본 연구실에서는 본래 원자 분석에 활용되는 LIBS를 분자 분석으로 확장하여 Zr과 ZrO_2 의 중간생성물인 ZrO 신호 계측에 성공하였다. 신호처리과정을 통해 노화기간에 따라 샘플의 ZrO_2 함유량을 정량적으로 도출하였다. 본 연구의 결과는 탄약과 같은 폭발물질의 노화수명과 장치의 안전성 확보에 대한 기준으로 활용 될 수 있다.

두번째로는, 대표적인 열분석 장비인 Differential Scanning Calorimetry (DSC)와 Thermogravimetric analysis (TGA) 장비를 이용하여 이러한 노화된 고에너지물질의 열적 특성변화와 활성화에너지(Ea)나 빈도인자 (Aa)와 같이 아레니우스 식에 혼해 응용되는 kinetic parameter들을 구함으로써 노화에 따른 성능변화를 도출하는 것이다. 그리고 노화된 고에너지물질의 수명을 구하는 대표적인 방법인 van't Hoff 방정식과 위에서 얻은 활성화에너지 값을 통해 노화된 물질의 수명을 계산하고, 어떠한 노화조건이 성능감소, 즉 수명감소에 극대한 영향을 끼치는지 제시할 수 있으며 적정보관조건 또한 도출할 수 있다. 본 연구에서는 이러한 고에너지물질, 특히 Zirconium Potassium Perchlorate (ZPP) 또는 Titanium Hydride Potassium Perchlorate (THPP)와 같이 NASA 표준개시제로 흔히 사용되는 개시제에 대한 노화연구를 진행하였다.

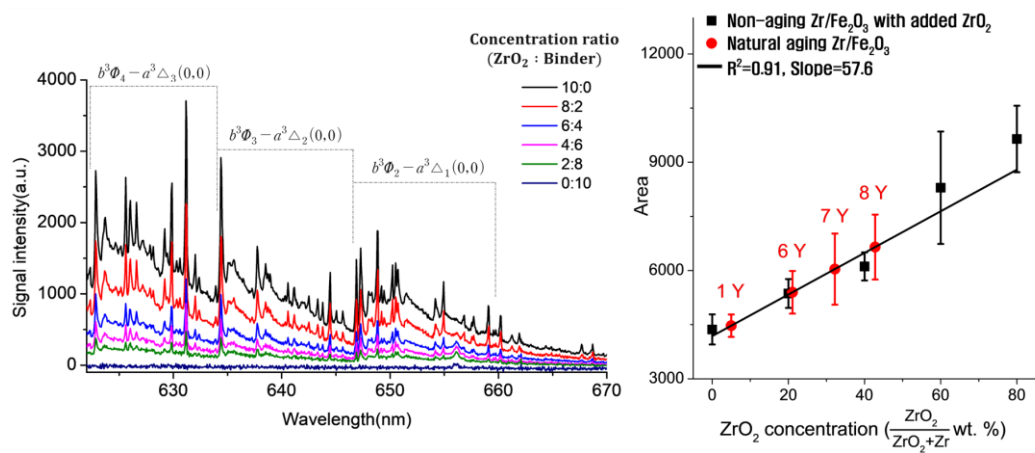


Fig 1. ZrO 신호 및 ZrO₂ 함량에 대한 정량분석 결과

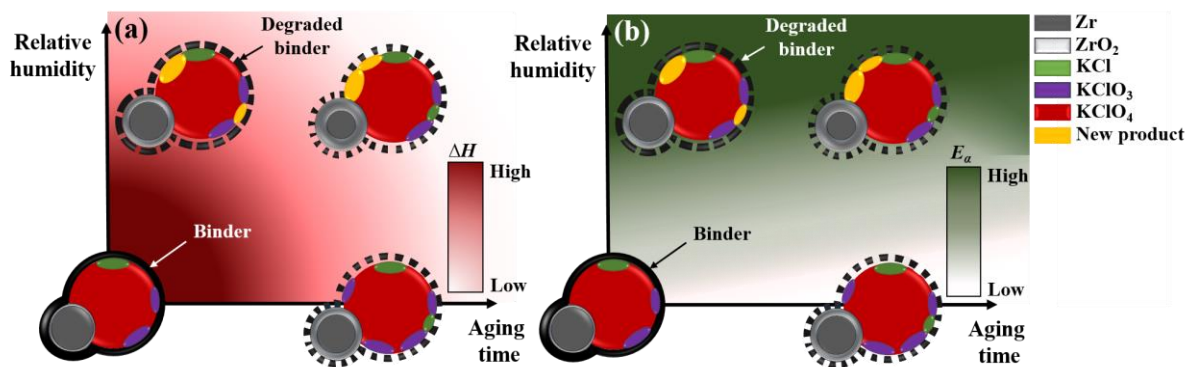


Fig 2. Illustration of the hygrothermal aging effects on ZPP chemical compound representing (a) changes in heat of reaction, and (b) increase in activation energy.

학부생 선택 가능 논문 주제

10-6-1 LIBS 를 활용한 Zr 계 점화물질의 노화 과정 이해

10-6-2 DSC 를 이용한 고에너지 물질의 Aging 연구

담당조교 : 오주영 (5_ju0@snu.ac.kr)